

УДК 512.2:546.267'774

**В. Ковбашин**

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

**ГРАФІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ БУДОВИ  
АКВОДІОКСОТРИЦІАНОКОМПЛЕКСІВ ВОЛЬФРАМУ (IV)  
ЗАГАЛЬНОГО СКЛАДУ  $\text{Kat}_3([\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}])_2$  ( $\text{Kat}=\text{Ba}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ )**

В [1] описана кристалічна структура акводіоксотриціановольфрамата (IV) рубідія  $\text{Rb}_3[\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ . Однак, виділити монокристали інших представників цієї сполуки, а саме  $\text{Kat}_3([\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}])_2$  ( $\text{Kat}=\text{Ba}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ ), з метою вивчення їх кристалічної структури, не вдалося. Тому цікавим було промоделювати засобами машинної графіки їх теоретично можливу будову.

За вихідну модель служила відома октаедрична структура ціанокомплексу  $\text{Rb}_3[\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ . Засобами машинної графіки з використанням графічного пакету MODEL [2,3] нами створювались координатні моделі можливих структур акводіоксотриціановольфраматів (IV) в залежності від виду зовнішньосферного катіону. Координати атомів задавались з врахуванням можливих віддалей зв'язків та валентних кутів, характерних для діоксоціанідних комплексів [4]. Оцінка величин зв'язків та валентних кутів у довільному напрямку здійснювалась шляхом використання апарату перетворень простору, що дозволяє розмістити каркасну координатну модель в необхідному положенні. Опис вузлів каркасної моделі здійснювався їх заданням в однорідних координатах, а комбінації перетворень, які є сумою повороту, переносу, масштабування, охоплювалися матричним підходом.

Подана модель описана у загальній (світовій) системі координат. З метою отримання її відображення на екрані здійснювалися проєктивні перетворення.

Таким чином, змінюючи привязку вузлів координатної моделі і її орієнтацію по валентних зв'язках шляхом повороту можна досягнути бажаної орієнтації координатної моделі і оцінити величини зв'язків та валентних кутів візуально на довільній площині проєкцій.

Графічне моделювання акводіоксотриціанокомплексів вольфраму (IV) загального складу  $\text{Kat}_3([\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}])_2$  ( $\text{Kat}=\text{Ba}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ ) показало, що можливий вплив зовнішньосферного катіону на деформацію октаедричної будови наведених вище ціанокомплексів зростає із збільшенням їх радіусу, тобто від  $\text{Ba}^{2+}$  до  $\text{Mg}^{2+}$ .

**Література.**

1. Ковбашин В.І., Милик М.П. Синтез и исследование акводіоксотриціановольфрамата (IV) рубідія // Журнал неорганической химии. – 1992. - №8. – с. 1828 – 1829.
2. В.І. Ковбашин, А.І. Пік. Графічне моделювання реакцій комплексоутворення та будови гептаціанідних комплексів вольфраму (IV) загального складу  $[\text{W}(\text{CN})_7\text{X}]^{n-}$  // Збірка праць міжнародної науково – практичної конференції присвяченої 200 – річчю створення нарисної геометрії: “Сучасні проблеми геометричного моделювання”. – Харків – 1998. – Частина 3. – с. 119 – 111.
3. В.І. Ковбашин, А.І. Пік. Графічне моделювання реакцій комплексоутворення та будови гептаціанідних комплексів молібдену (IV) загального складу  $[\text{Mo}(\text{CN})_7\text{X}]^{n-}$ . // Труды Таврической государственной агротехнической академии. Выпуск 4. Прикладная геометрия и инженерная графика. – 1999 - Т.8. –с. 98 – 101.
4. Griffith W. P. Cyanide complexes of the early transition metals (groups IVa – VIIa) // Coord. Chem. Revs. - 1975 – V. 17. - №2 – 3. – p. 177 –277.